学校编码：10384　　　　分类号 ______ 密级 ______
学号：　17020051301606　　　　UDC ____________________

厦门大学

硕 士 学 位 论 文

双边的二次残量迭代法

Two-sided quadratic residual iteration

陈 梅 香

指导教师姓名：　卢 琳 璋 教授
专 业 名 称：　计 算 数 学

论文提交日期：　2008 年 4 月
论文答辩日期：　2008 年 　月
学位授予日期：　2008 年 　月

答辩委员会主席：____________
评　　阅　　人：____________

2008 年 4 月

厦门大学学位论文原创性声明

兹呈交的学位论文，是本人在导师指导下独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考的其它个人或集体的研究成果，均在文中以明确方式标明。本人依法享有和承担由此论文而产生的权利和责任。

责任人（签名）：

年　月　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人完全了解厦门大学有关保留、使用学位论文的规定。厦门大学有权保留并向国家主管部门或其指定机构送交论文的纸质版和电子版，有权将学位论文用于非赢利目的的少量复制并允许论文进入学校图书馆被查阅，有权将学位论文的内容编入有关数据库进行检索，有权将学位论文的标题和摘要汇编出版。保密的学位论文在解密后适用本规定。

本学位论文属于

1、保密（　），在　　　年解密后适用本授权书。

2、不保密（).

（请在以上相应括号内打”✓”）

作者签名：　　　　　　　日期：　　　年　月　日

导师签名：　　　　　　　日期：　　　年　月　日

目　录

Contents

摘　要

二次残量迭代法 (QRI) 是一种求解二次特征值问题的近似特征值及近似右特征向量的方法。QRI 在算法过程中生成一组正交基，同时用这组基及正交投影法将原二次特征值问题投影到一个低阶的二次特征值问题求解。通常来说投影后问题的阶数远远小于原问题的阶数。因此，可节省许多的计算量。

本文利用 QRI 的思想提出双边的二次残量迭代法 (TQRI) 。用 TQRI 来求解二次特征值问题的近似特征值及相应的左右近似特征向量 (或称为 Ritz 向量) 。TQRI 生成一组双正交基，分别张成求解左右特征向量的近似子空间，并用斜投影法将原二次特征值问题投影到一个低阶的二次特征值问题来求解。而且在生成这组双正交基的过程中，同时考虑让分别在两个近似子空间中产生的左右近似特征向量具有一定的精确度，我们给出的数值例子也证实了这点。TQRI 法的优势主要体现在两个方面；其一，采用斜投影法求得的 Ritz 值可以更好的逼近真实解；其二，可以直接逼近二次特征值的左特征向量，尤其是对于非对称问题。

本文的结构和内容如下：第一章简要地介绍了二次特征值问题及其解法。第二章介绍了残量反迭代法, 并给出其收敛性质. 第三章介绍了二次残量迭代法 (QRI) 。第四章介绍了双边二次残量迭代法, 在本章的第一节中, 说明了本文提出的双边二次残量迭代法的出发点, 第二节给出了双边二次残量迭代法, 并给出几点算法的说明。最后，我们用数值实验说明我们所提出的二次残量迭代法所具有的优越性。

关键词：二次残量迭代法；双正交基；斜投影法；双边二次残量迭代法。

Abstract

Qudratic residual iteration (QRI) is an algorithm to find the approximate eigenvalue and the corresponding right appriximate eigenvector of the quadratic eigenvalue problem(QEP). QRI generate an orthogonal basis, and orthogonal projection is applied to the QEP to reduce to the QEP with matrix dimension of lower order.

This paper introduce a variant of QRI called two-sided quadratic residual iteration(TQRI). We use TQRI to solve the approximate eigenvalue and the corresponding left and right approximate eigenvector(or Ritz vector). Given a pair of starting vectors, TQRI generate biorthonormal bases of two subspaces. And the oblique projection is considered. The left and right approximating eigenvector can be solved from the two spaces at the same time. And the convergence behaviors of both right and left appriximating eigenvectors are essentially the same. Numerical experiment is given to identify the method. The advantage of TQRI is mainly embodied in two aspects. First, the Ritz value can approach the exact value more exactly. Second, it can approach the left eigenvector directly, especially for the nonsymmetric eigenvalue problem.

In chapter 1, we give an introduction of quadratic eigenvalue problem(QEP), and the methods to solve it. In chpter 2, we introduce the Residual inverse iteration and the convergence behaivors of the approximate eigenvector and the approximate eigenvalue. In chapter 3, we introduce quadratic residual iteration. In chpter 4, we first introduce the motivation of the two-sided quadratic residual iteration we prsent in the paper in section 4.1. In section 4.2, we present the two-sided quadratic residual iteration. Lastly, we present the superiority of our method using the numerical experiments.

Key word: QRI, biorthonomal bases, oblique projection, TQRI.

符 号 说 明

以下是本文会遇到的一些记号:

$\lambda \in \mathbb{C}$ ：表示标量 λ 是复数。

$x \in \mathbb{C}^n$ ：表示向量 x 是 n 维复的列向量。

H ：表示矩阵的共轭转置。

$\mathbb{C}^{n\times n}$ ：表示 $n \times n$ 复矩阵的集合。

$\|x\|$ ：表示向量 x 的任意范数。

$|\sigma|$ ：表示标量 σ 的绝对值。

I ：表示单位矩阵。

$sign(\omega)$ ：表示标量 ω 的符号。

第一章 引言

在很多领域的计算问题都会碰到求解二次特征值问题, 例如声学系统的动态分析, 流体力学中流量的线性稳定性分析以及信号处理等. 因此越来越多的数学工作者开始关注和研究二次特征值问题。

§ 1.1 二次特征值问题

二次特征值问题是指求 $\lambda \in \mathbb{C}$ 和非零向量 $x \in \mathbb{C}^n$ ， $y \in \mathbb{C}^n$ ，使得

$$Q_n(\lambda)x = (\lambda^2 M + \lambda C + K)x = 0, \quad y^H Q_n(\lambda) = y^H(\lambda^2 M + \lambda C + K) = 0 \quad (1.1)$$

其中 M, C, K 是 $n \times n$ 复矩阵， λ 称为 $Q_n(\lambda)$ 的一个特征值，非零向量 x, y 是相应的右特征向量和左特征向量。三元组 (λ, x, y) 称为 $Q_n(\lambda)$ 的特征组。

二次特征值问题是一类非常重要的非线性特征值问题, 相比于一般的特征值问题:

$$SEP: \quad Ax = \lambda x \quad (1.2)$$

和广义特征值问题:

$$GEP: \quad Ax = \lambda Bx \quad (1.3)$$

它较不为人们所熟悉，也没有较常规的求解方法，与 SEP 和 GEP 问题最大的不同是二次特征值问题有 $2n$ 个特征值，相应的可能有 $2n$ 个右特征向量和 $2n$ 个左特征向量。显然, 在 n 维空间中, 这 $2n$ 个右 (左) 特征向量是线性相关的，而且二次特征值问题也不存在类似于 SEP 中的 shur 分解或 GEP 中的广义 shur 分解的简单标准型。这就增加了求解二次特征值问题的难度。文献 [10] 详细地介绍了近年来二次特征值问题的理论知识、应用及算法。

§ 1.2 求解二次特征值问题的方法

目前，已经有很多求解二次特征值问题的方法，大致可以分为两类。一类是 “线性化” 方法。为了方便起见，我们以求二次特征值问题的特征

值及其相应的右特征向量为例来介绍“线性化”方法。也就是说，在这一节中我们考虑的二次特征值问题是指求 $\lambda \in \mathbb{C}$ 和非零向量 $x \in \mathbb{C}^n$，使得

$$Q_n(\lambda)x = (\lambda^2 M + \lambda C + K)x = 0$$

记

$$D = \begin{pmatrix} -C & -K \\ I & 0 \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} M & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad z = \begin{pmatrix} \lambda x \\ x \end{pmatrix} \tag{1.4}$$

那么二次特征值问题：

$$Q_n(\lambda)x = (\lambda^2 M + \lambda C + K)x = 0 \tag{1.5}$$

就可以转化为等价的广义特征值问题

$$Dz = \lambda Gz \tag{1.6}$$

还有其他常用的线性化形式可以参考文献 [10， 19]。如果阶数 n 不是很大，我们可以使用 QZ 算法 [3] 或者其他直接法来求解问题 (1.6) 所有的特征值和对应的特征向量。对于大规模系统可以采用基于 Krylov 子空间的方法，例如： Arnoldi 或者 Lanczos 方法，来近似的求解其中一部分需要的特征值和对应的特征向量。这类算法的优点是速度较快，而且可以使多个近似特征值同时收敛，即可同时求得多个特征值。但是“线性化”方法也存在着一些不足之处。首先，线性化后问题的规模将是原问题的两倍，使得存储量和计算量显著增加；其次，线性化后原始问题所具有的特殊性质，尤其是隐含的谱性质 (见 Table 1)，经过线性化后不一定会继续保留，这也会给问题的求解带来困难，同时影响结果的准确程度。

另一类是“直接求解”法。这类方法将原二次特征值问题直接投影到一个低阶的二次特征值问题求解。由于通常来说投影后问题的阶数并不会很大，那么就可以用“线性化”法来求解了，所需的计算量也就少了许多。这类方法最显著的特征是，由于投影的过程是直接应用于原始问题而并非某一个线性化的形式，因此矩阵 M, C, K 所具有的性质将显式的保留在投影后的系统中。这也就意味着，原始问题中所具有的谱性质也将肯定保留

在投影后的系统中。例如： SOAR[8]， Jacobi-Davidson[6] 方法。但是“直接求解”法的收敛速度一般会比“线性化”方法慢。

§ 1.3 本文的主要工作

2000 年， KARL 在文章 [1] 中提出了二次残量迭代法 (QRI) 。 QRI 是一种“直接求解”法。 QRI 方法的思想与 Jacobi-Davidson 方法是类似的。给定近似子空间一组正交基 V_k 与近似右特征向量 x_k ，选取适当的向量将已有的近似子空间扩充为 $k+1$ 维的，同时得到向量 v_{k+1} ，使得 $V_{k+1}=[V_k\ v_{k+1}]$ 成为新的近似子空间的一组正交基。其中向量 v_{k+1} 要满足存在某个常数 $\alpha\in\mathbb{C}$ ，使得向量 $x_k+\alpha v_{k+1}$ 能更趋近于所要求的特征向量。根据残量反迭代法 [2] ，可以知道 QRI 方法选取的向量 v_{k+1} 能够满足这个要求。由于 QRI 方法只构造近似子空间的一组正交基，并利用这组基作投影，因此可以认为这个方法是正交投影法或者单边法。在本文中，我们将这个方法推广到双边的情况，也就是说，需要构造一组双正交基张成两个近似子空间。假设这组双正交基为 V_k 和 W_k ，我们可以利用斜投影的技术将原始的 n 阶系统投影到如下的 k 阶系统

$$Q_k(\lambda)=W_k^HQ_n(\lambda)V_k$$

若已知 $Q_k(\lambda)$ 的特征值和左右特征向量 (θ,f,g) ，可以通过下面的的关系式

$$(\theta,x,y)=(\theta,V_kf,W_kg)$$

得到 $Q_n(\lambda)$ 的 Ritz 值和对应的 Ritz 向量，也即原始问题的近似特征组。与正交投影的方法相比，本文中提出的斜投影算法的优势主要体现在两个方面。其一，采用斜投影算法求得的 Ritz 值可以更好的逼近真实解，关于这一现象可以从数值例子中看出。其二，用正交投影法无法直接逼近二次特征值的左特征向量，尤其是对于非对称的问题。而斜投影的方法正好可以克服这一缺点，由斜投影法我们不仅可以得到 Ritz 值，而且可以同时得到对应的 Ritz 向量。

本文的其它内容安排如下：在第二章我们介绍了残量迭代法，作为分析 QRI 算法的理论基础。第三章介绍了二次残量迭代法 (QRI)，并分析算法的主要思想。第四章讨论了双边的二次残量迭代法 (TQRI)，并给出了算法的一些说明，体现此算法的优势。最后一章是数值实验，用计算机随机产生的四个特征值问题进行测试，并比较 TQRI 法与 QRI 法的数值效果，体现本文所提出的算法的优越性。

矩阵的性质	特征值的性质	特征向量的性质
M 非奇异	$2n$ 个特征值	
M 奇异	有无穷大特征值	
M, C, K 都是实矩阵	特征值或者是实数，或者以共轭的形式成对出现	若 x 是对应于 λ 的右特征向量，则 x^H 是对应于 λ^H 的右特征向量
M, C, K 是 Hermitian 矩阵	特征值或者是实数，或者以共轭的形式成对出现	若 x 是对应于 λ 的右特征向量，则 x 是对应于 λ^H 的左特征向量
M 是 Hermitian 正定的， C, K 是 Hermitian 半正定的	特征值的实部小于或等于零	
M, K 是 Hermitian 矩阵且 M 是正定的， $C = -C^H$	特征值或者是纯虚数，或者是以 $(\lambda, -\lambda^H)$ 的形式成对出现	若 x 是对应于 λ 的右特征向量，则 x 是对应于 $-\lambda^H$ 的左特征向量
M, K 是实对称正定矩阵， $C = -C^T$	特征值是纯虚的	

Table 1: 二次特征值问题所具有的一些谱性质 [10]

第二章 残量反迭代法

反迭代法是求解特征值问题的特征对的经典解法之一, 具有良好的收敛性质。但是对于非线性特征值问题, 用反迭代法来求解特征对, 所需的计算量很大。因此, Neumaier A.[2] 利用残量对反迭代法进行变形, 提出了残量反迭代法, 以克服反迭代法中存在的问题。

在这一章里, 我们研究有限维非线性特征值问题

$$A(\lambda)x = 0, \quad \lambda \in \mathbb{C}, \quad x \in \mathbb{C}^n - \{0\}$$

其中 $A : \mathbb{C} \to \mathbb{C}^{n\times n}$ 是一个连续的矩阵值映射, 设 $\sigma \in \mathbb{C}$ 是一个已知的数, 它与 λ 很接近, 且 $A(\sigma)$ 是非奇异的, e 是一个标准化向量满足:

$$e^H x = 1;$$

通常 e 是一个单位向量, 且在向量 x 的分量值最大的位置的分量值为 1 。在这些的前提下, 残量反迭代法的描述如下。

算法 2.1 **残量反迭代法**.

1. 令 $l = 0$, 计算 x 的一个初始近似值 x_0 满足

$$A(\sigma)\bar{x}_0 = b, \quad x_0 = \bar{x}_0 / e^H \bar{x}_0;$$

2. 计算下面的其中一个方程求得 λ_{l+1}

$$x_l^H A(\lambda_{l+1}) x_l = 0 \tag{2.1}$$

$$e^H A(\sigma)^{-1} A(\lambda_{l+1}) x_l = 0 \tag{2.2}$$

   其中当 $A(\lambda)$ 是 Hermitian 矩阵且 λ_l 是实数时, 解方程 (2.1) 求得 λ_{l+1} ; 否则, 解方程 (2.2) 且取较接近于 λ_l 的根作为 λ_{l+1} 。

3. 计算残量

$$r_l = A(\lambda_{l+1}) x_l.$$

4. 计算方程组

$$A(\sigma)dx_l = r_l$$

标准化向量

$$\bar{x}_{l+1} = x_l - dx_l, \quad x_{l+1} = \bar{x}_{l+1}/e^H\bar{x}_{l+1}$$

5. 令 $l = l+1$，转到步骤 2。

特别地，当 $A(\lambda) = A - \lambda I$ 时，由残量反迭代法有

$$\begin{aligned}(A-\sigma I)\bar{x}_{l+1} &= (A-\sigma I)x_l - (A-\sigma I)dx_l \\ &= (A-\sigma I)x_l - (A-\lambda_{l+1}I)x_l \\ &= (\lambda_{l+1}-\sigma)x_l.\end{aligned}$$

因此，$\bar{x}_{l+1}$ 与 $(A-\sigma I)^{-1}x_l$ 只差一个常数倍, 同样的 x_{l+1} 与 $(A-\sigma I)^{-1}x_l$ 也是只差一个常数倍；也就是说，当 $A(\lambda) = A - \lambda I$ 时，残量反迭代法与带位移的反迭代法是等价的；也就具有反迭代法的良好的收敛性质。对于非线性的特征值问题, 反迭代法的一些收敛性质在残量反迭代法中仍能成立。下面是残量反迭代法的收敛性分析。

定理 1[2]：若 $\hat{\lambda}$ 是 $A(\lambda)$ 的一个孤立的单特征值， $\hat{x}$ 是相应的标准化特征向量，满足 $e^H\hat{x} = 1$. 那么当位移 σ 与 $\hat{\lambda}$ 很接近时，残量反迭代是收敛的，且有

$$\frac{\|x_{l+1}-\hat{x}\|}{\|x_l-\hat{x}\|} = O(|\sigma-\hat{\lambda}|). \qquad |\lambda_{l+1}-\hat{\lambda}| = O(\|x_l-\hat{x}\|^t).$$

其中若在算法 2.1 的第二步中求解的方程是 (2.2) 时， $t=1$；若矩阵 $A(\lambda)$ 是 Hermitian 的，$\hat{\lambda}$ 为实数，而且在算法 2.1 的第二步中求解的方程是 (2.1) 时 $t=2$。

定理 1 的证明可以参考文献 [2]。它给出了残量反迭代的局部收敛性，表明残量反迭代具有线性收敛性。也就是说，若已知近似特征向量 x_l 及位移 σ，求得近似特征值 λ_{l+1}，那么向量 $x_l - A^{-1}(\sigma)A(\lambda_{l+1})x_l$ 可更逼近于真实解。另外，从定理 1 中我们可以知道，在每一步迭代中可以通过取不

同的位移 σ 来加快收敛速度。特别地，如果在求 λ_{l+1} 与 x_{l+1} 迭代步骤中取 σ 与 λ_{l+1} 的值很接近时，那么残量反迭代的收敛性可以达到二次（甚至是三次）的。但是，在每一次迭代时都得计算一个系数矩阵为 $A(\sigma)$ 的线性方程组，当 σ 的值不同时所需的计算量可能就会很大，这时我们就只在其中几步迭代中变换位移 σ 的值。